Controlando as propriedades eletrônicas do isolante topológico de seleneto de bismuto

Friday 2 December 2016 17:25 (15 minutes)

Isolantes topológicos são materiais que possuem um gap de energia na região do nível de Fermi em sua estrutura de bandas eletrônica, o que o tornam isolantes. Porém, o que o tornam esses materiais diferentes é o fato de possuírem estados metálicos protegidos em sua borda ou superfície. Estes estados estão associados a uma combinação de interações spin-órbita e simetria de reversão temporal. O seleneto de bismuto (Bi_2Se_3) está entre os isolantes topológicos tridimensionais mais investigados atualmente. A fase bulk do Bi_2Se_3 apresenta uma estrutura romboédrica composta por camadas atômicas quintuplas (Quintuple Layers - QL) empilhadas ao longo do eixo-c, as interações entre QLs são dominadas por forças de van der Waals (vdW). Existem vários estudos recentes na literatura investigando o efeito de adicionar espécies hóspedes no gap de vdW (região entre duas QLs) dos isolantes topológicos, o objetivo destes trabalhos é obter um controle das propriedades do material. Em particular, um recente trabalho mostrou a possibilidade de sintetizar moléculas orgânicas de piridina intercaladas entre os gap de vdW do Bi_2Se_3 . Um dos efeitos de intercalar as moléculas é um aumento na distância de separação entre as QLs. Neste trabalho, foi usado simulações de primeiros princípios para propor um mecanismo de controlar a ocorrência de estados metálicos no Bi_2Se_3 , através da combinação de intercalamento de moléculas de piridina e aplicação de uma pressão externa comprimindo o sistema. Além disso, vamos investigar a interação do Bi_2Se_3 com um substrato amorfo de dióxido de silício.

Tipo de Apresentação

Oral

Author: Dr SANTOS DE OLIVEIRA, Igor (UFLA)

Presenter: Dr SANTOS DE OLIVEIRA, Igor (UFLA)

Session Classification: Comunicações Oraís III